

5 Modelagem Proposta

Conforme mencionado anteriormente, todos os modelos sub-malha baseados em viscosidade turbilhonar consistem na adição de um termo difusivo às equações de Navier-Stokes (N-S), com o objetivo de eliminar ou atenuar as menores estruturas que podem ser representadas pela malha. Uma vez que estas são as últimas estruturas na cadeia de transferência de energia, e não havendo modos ainda menores para receber o excesso de energia, estas menores estruturas suportadas pela malha sofreriam um crescimento indeterminado caso não fosse adicionado um termo dissipativo nas equações de N-S. O segredo de uma simulação de grandes escalas bem sucedida é a escolha apropriada de ν_{SGS} , de forma que seja provida a mínima dissipação para que os menores modos sejam devidamente atenuados, sem contudo interferir demais em outras estruturas um pouco maiores que possam ser importantes para o restante do escoamento. Neste contexto, o melhor resultado, que pode ser alcançado por esta classe de modelos, é obtido quando se utiliza algum tipo de controle por retro-alimentação, tal como o proposto por Germano (1991), isto é, uma modelagem dinâmica, a qual automaticamente diminui a dissipação provida pelo termo sub-malha quando os menores modos contém pouca energia, e aumenta a mesma quando estes últimos se tornam importantes.

O modelo dinâmico foi originalmente sugerido por Germano (1991) como uma forma de automaticamente ajustar o coeficiente presente no modelo sub-malha de Smagorinsky (1963), otimizando-o em tempo real para os mais diversos regimes de escoamento. Embora a idéia original fora a de que o coeficiente deveria ser o mesmo para dois níveis de filtragem diferentes e consecutivos, mais tarde, Germano (1999) mostrou que a modelagem dinâmica poderia ser reinterpretada como um mecanismo de controle por retro-alimentação que tenta manter constante a razão entre a energia contida no primeiro nível de filtragem e a contida no segundo.

Conforme mencionado no ítem 3.6.2, o modelo dinâmico sofre de problemas de instabilidade numérica. Adicionalmente, por depender de um

único comprimento de escala, $\overline{\Delta}$, mostra-se ainda sensível a anisotropias de malha e, como todo modelo de viscosidade turbilhonar, dissipa considerável energia numa boa parte do espectro, vizinho aos menores modos.

Na Seção (5.1) é apresentada a fundamentação teórica e a descrição do modelo proposto e investigado no presente trabalho, seguida de possíveis variantes e melhorias na Seção (5.2). Validação da metodologia proposta é apresentada no Capítulo (6), onde testes simples comprovam que a presente proposta atinge os objetivos para os quais foi desenvolvida.

5.1

Modelo de Forçamento Sub-malha

Como uma idéia alternativa à hipótese de Boussinesq, propõe-se uma nova abordagem, que consiste em forçar a atenuação das menores estruturas através da inclusão de um termo de forçamento \mathbf{f} nas equações de N-S, o qual é relacionado com o tensor sub-malha de acordo com $\mathbf{f} = \nabla \cdot \tau_{SGS}$. Porém, ao invés de sugerir uma expressão para τ_{SGS} e adicionar seu divergente às equações, propõe-se modelar diretamente a força \mathbf{f} de tal forma que os menores modos suportados pela malha – ou os de maior ”frequência espacial” – sejam drasticamente atenuados, enquanto modos imediatamente maiores permanecem inalterados. Com isso, dois problemas são resolvidos simultaneamente: a modelagem da cascata de energia direta, e os problemas de instabilidade numérica trazidos por esquemas não-dissipativos (tais como ”diferenças centradas”) comumente empregados.

Sem perda de generalidade, o desenvolvimento que se segue é feito, inicialmente, para o transporte de um escalar ϕ e, posteriormente, extrapolado para o transporte de quantidade de movimento. Apesar de, no caso de transporte de um escalar passivo, o termo adicionado não ter dimensões de força, utiliza-se, ainda assim, a denominação “termo de forçamento” por analogia ao caso de transporte de quantidade de movimento, que é o objetivo final deste artifício.

O primeiro passo na direção de se construir um termo de forçamento que age seletivamente no espectro é identificar uma diferença fundamental entre o menor modo suportado pela malha, que deve ser atenuado, e um modo de maior comprimento de onda, mais suave. Convenciona-se chamar, no presente trabalho, o menor modo suportado pela malha de “modo de corte”, por ser o de maior frequência espacial permitido, ou “modo indesejável”, enquanto os outros modos mais suaves são denominados “modos suaves”. Uma possível maneira de distingui-los consiste na avaliação

das projeções dos gradientes da grandeza transportada – neste caso, ϕ – nas faces do volume de controle. Na malha mostrada na Fig. 5.1, onde são apresentados apenas dois volumes de controle, com centróides P (principal) e N (vizinho), o gradiente no centro do volume principal P pode ser calculado, como mostrado no Capítulo 4, Eq. 4-9, utilizando-se o teorema de Gauss, como:

$$(\nabla\phi)_i = \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \phi_f \mathbf{A}_f, \quad (5-1)$$

onde V_i é o volume da célula i , N_i é o número de faces do volume de controle i , ϕ_f é a variável transportada avaliada por interpolação linear na face “ f ”, e \mathbf{A}_f é um vetor ortogonal à face “ f ”, apontando para fora do volume de controle, de módulo igual à área da mesma face.

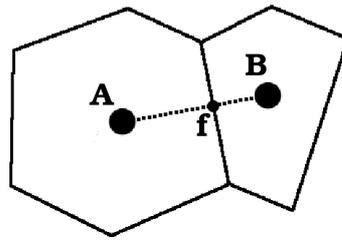


Figura 5.1: Duas células de uma malha geral, não-estruturada.

Como mencionado no Capítulo 4, para a projeção do gradiente no segmento de reta \mathbf{AB} , no ponto onde o mesmo segmento intercepta a face, f , duas diferentes abordagens são possíveis. Para facilitar a apresentação, as duas definições do gradiente são repetidas aqui, e subscritos diferentes são usados para indicar as diferentes abordagens.

Na primeira abordagem o gradiente na face pode ser obtido da interpolação dos gradientes avaliados nos dois centróides A e B para o ponto f do localizado na face,

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_{\text{interp}} = \mathbf{AB} \cdot [w(\nabla\phi)_A + (1-w)(\nabla\phi)_B] \quad w = \frac{|Bf|}{|AB|}, \quad (5-2)$$

ou, alternativamente, pela diferença entre os valores da variável transportada ϕ , disponível nos dois centróides,

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_{\mathbf{n}} = \phi_B - \phi_A. \quad (5-3)$$

As Eqs. (5-2) e (5-3) são apresentadas numa forma geral, tridimensional, podendo, portanto, ser aplicadas a qualquer topologia, incluindo malhas não-estruturadas. Nas mesmas equações, \mathbf{AB} denota o vetor do ponto A ao ponto B , e $|Bf|$ é o módulo do vetor \mathbf{Bf} , ou melhor, a distância do ponto B até a face f . Os subscritos A e B referem-se aos pontos nos quais os gradientes são avaliados, enquanto os subscritos **interp** e **n** identificam de que forma os gradientes em f são calculados. Adicionalmente, um erro ϵ_{∇} pode ser definido como a diferença entre as duas formas de se obter o gradiente na face:

$$\epsilon_{\nabla} \triangleq \frac{\mathbf{AB}}{|AB|^2} \left\{ \mathbf{AB} \cdot \left[(\nabla\phi)_{\mathbf{n}} - (\nabla\phi)_{\mathbf{interp}} \right] \right\}, \quad (5-4)$$

o que é equivalente a

$$\epsilon_{\nabla} \triangleq \frac{\mathbf{AB}}{|AB|^2} \left\{ (\phi_B - \phi_A) - \mathbf{AB} \cdot \left[(\nabla\phi)_{\mathbf{interp}} \right] \right\}. \quad (5-5)$$

O gradiente (ou qualquer outro operador derivada de primeira ordem) da variável em questão nos centróides dos volumes de controle, quando avaliado por meio de esquemas centrados, ou não-polarizados, é incapaz de capturar os menores modos suportados pela malha, o que é, sem perda de generalidade, ilustrado na Fig. 5.2 (a) para o caso unidimensional. De forma recíproca, constata-se que os menores modos suportados pela malha são transparentes para os operadores derivada de primeira ordem, no sentido de que, havendo uma superposição de modos suaves com esses menores modos, o resultado retornado pelo operador derivada independe da amplitude ou mesmo da presença desses últimos menores modos. Neste trabalho, convencionou-se dizer que esses menores modos são suportados pela malha, porém não são suportados por um esquema numérico centrado, conforme Eq. (5-1), comumente empregado em Simulações de Grandes Escalas por ser não-dissipativo. Assim, num certo sentido, há perda de informação ao se utilizar tal esquema numérico numa equação diferencial tal qual a equação de Navier-Stokes.

Por outro lado, o gradiente calculado de acordo com a Eq. (5-3) é sensível à presença dos menores modos suportados pela malha, como pode ser verificado na Fig. 5.2 (a). Sendo assim, para um modo suave, Fig. 5.2 (b), ou mais rigorosamente, para um modo que pode ser descrito por um polinômio de segunda ordem, ambos os métodos fornecem o mesmo resultado para uma malha regularmente espaçada. Entretanto, para o menor modo suportado pela malha – maior frequência espacial, conforme Fig. 5.2

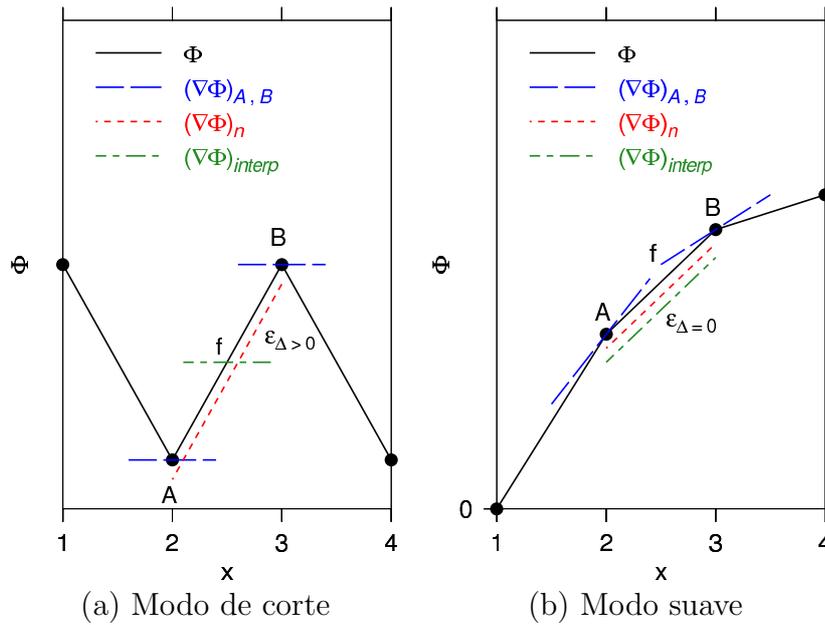


Figura 5.2: Formas diferentes de avaliação do gradiente nas faces: a) Modo de corte; b) Modo suave.

(a), o erro ϵ_{∇} é significativamente maior, sendo proporcional à amplitude do modo de corte. Portanto, ϵ_{∇} pode ser usado como um detetor de “modos de corte”, efetivamente medindo a diferença entre a energia contida nas estruturas de menor comprimentos de onda e a contida em estruturas mais suaves, sendo especialmente adequado à formulação do termo artificial \mathbf{f} . Note-se ainda que, por ser uma diferença das duas formas do gradiente, ϵ_{∇} contém apenas informações complementares às que já estão presentes na equação de transporte, trazidas pelo operador derivada do esquema centrado.

Examinando o caso unidimensional, constata-se que a célula computacional utilizada nos cálculos acima envolve 4 centróides de volumes de controle. Mostra-se facilmente que, para malhas regulares e para um modo no qual é possível descrever os valores das variáveis transportadas por um polinômio de grau menor ou igual a 2, o erro ϵ_{∇} será nulo. Assim, um “forçamento artificial” \mathbf{f} baseado nesse erro não provocará nenhuma atenuação adicional nas equações de transporte. Observe que as atuais soluções empregadas em LES – incluindo modelagem baseada em viscosidade turbilhonar, modelos dinâmicos e esquemas dissipativos – inevitavelmente provocam uma atenuação da mesma estrutura acima (descrita por um polinômio de grau 2), afetando, portanto, uma região maior do espectro.

De forma análoga ao termo advectivo presente numa equação de

transporte, o qual pode ser escrito na forma $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$, vê-se que a multiplicação de ϵ_{∇} por uma velocidade de transporte, \mathbf{u} , dá origem a um termo de natureza essencialmente advectiva. Assim, uma possível expressão para este termo é:

$$\mathbf{f} = \mathbf{u} \cdot (\epsilon_{\nabla})_c, \quad (5-6)$$

onde o subscrito c denota o valor avaliado no centróide.

Entretanto, antes de construir a forma final da força – que é uma variável armazenada no centróide – a partir da informação contida em ϵ_{∇} – que é uma variável associada à face – deve-se decidir como ponderar as contribuições de cada uma das faces pertencentes ao volume de controle em questão. Nas investigações preliminares, optou-se por atribuir pesos aos erros de cada face, privilegiando as informações a montante (*upwind*). Ou seja, somente os erros de gradiente ϵ_{∇} de faces localizadas à montante do centróide em questão são levadas em conta no cálculo da força, da seguinte forma:

$$\mathbf{f} = \mathbf{u} \cdot \frac{\sum_{f=1}^{N_f} \hat{w}_f (\epsilon_{\nabla})_f}{\sum_{f=1}^{N_f} \hat{w}_f}, \quad (5-7)$$

$$\hat{w}_f = \max [\mathbf{u} \cdot \mathbf{ab}, 0], \quad (5-8)$$

onde o subscrito f denota a f -ésima face de um dado volume de controle, $\mathbf{ab} = \mathbf{AB}/|\mathbf{AB}|$ é o segmento \mathbf{AB} normalizado, apontando em direção ao centróide em questão, N_f é o número de faces envolvendo o volume de controle, e \hat{w}_f são os pesos não normalizados.

De fato, com um termo de forçamento tal qual o descrito por Eq. (5-7), pode-se inferir, com base na Fig. 5.2 (a) que, no decorrer do tempo em que uma partícula do fluido é transportada por uma distância equivalente ao tamanho do volume de controle, o “modo de corte” (o menor modo suportado pela malha) já foi praticamente removido.

A aplicação do esquema de forçamento proposto nas equações de N-S é imediata, bastando, para isso, que se substitua a variável escalar ϕ , pela variável de interesse, \mathbf{u} . Decorrente do fato da variável de interesse ser agora vetorial, as equações do modelo tomam as seguintes formas:

$$(\nabla \mathbf{u})_A = \frac{1}{V_A} \sum_{f_A=1}^{N_A} \mathbf{A}f_{f_A} \mathbf{u}_{f_A}, \quad (5-9)$$

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla \mathbf{u})_{\text{interp}} = \mathbf{AB} \cdot [w (\nabla \mathbf{u})_A + (1 - w) (\nabla \mathbf{u})_B], \quad w = \frac{|Bf|}{|AB|}, \quad (5-10)$$

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla \mathbf{u})_{\mathbf{n}} = \mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A. \quad (5-11)$$

$$\epsilon_{\nabla} \triangleq \frac{\mathbf{AB}}{|AB|^2} \otimes \left\{ \mathbf{AB} \cdot [(\nabla \mathbf{u})_{\mathbf{n}} - (\nabla \mathbf{u})_{\text{interp}}] \right\}. \quad (5-12)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{u} \cdot (\epsilon_{\nabla})_c, \quad (5-13)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{u} \cdot \frac{\sum_{f=1}^{N_f} \hat{w}_f (\epsilon_{\nabla})_f}{\sum_{f=1}^{N_f} \hat{w}_f}, \quad (5-14)$$

$$\hat{w}_f = \max [\mathbf{u} \cdot \mathbf{ab}, 0], \quad (5-15)$$

Será mostrado mais adiante (Seção 6) que, tanto em situações simples de transporte de escalares passivos, quanto em simulações complexas de escoamentos aerodinâmicos incompressíveis envolvendo altos números de Reynolds e condições adversas de malha, essa nova abordagem resolve o problema de instabilidade numérica apresentada pelos tradicionais esquemas centrados, permitindo maior flexibilidade de adaptação da malha aos requisitos de diferentes regiões do escoamento, e provendo, ao mesmo tempo, funcionalidade de modelagem sub-malha.

A idéia de eliminar os menores modos espaciais em simulações numéricas de escoamentos turbulentos não é nova e constitui a essência das Simulações de Grandes Escalas. Além dos tradicionais e difundidos modelos baseados em viscosidade turbilhonar, outras propostas apresentadas na literatura ao longo dos anos incluem um processamento via transformadas de Fourier do campo de velocidade, realizado de tempos em tempos, a fim de se suprimir modos com frequência superior a um certo limite (Fornberg, 1977). A proposição de Fornberg, porém, por ser relativa ao espaço de frequências, limita-se na prática a geometrias simples e malhas estruturadas, enquanto a proposta apresentada, embora matematicamente menos rigorosa, estende-se inclusive a malhas não-estruturadas. Além disso, ao invés de uma filtragem esporádica, propõe-se aqui uma ação contínua de uma força atenuadora, calculada para cada instante de tempo. Note-se que a mesma idéia utilizada na formulação da força \mathbf{f} pode ser empregada na construção de um

filtro que elimina apenas modos indesejáveis, a ser empregado a cada certo número de passos de tempo, de forma análoga à sugerida por Fornberg para o domínio espectral. Porém, o presente trabalho restringe-se apenas ao caso de um forçamento contínuo, deixando a filtragem esporádica para futuras investigações.

5.2

Variantes do Modelo de Forçamento Sub-malha

O modelo de forçamento proposto na Seção 5.1 pode ser aprimorado, a partir da observação de que o gradiente calculado de acordo com Eq. (5-3) alcança um máximo de precisão no ponto central do segmento \mathbf{AB} , e não no ponto onde este segmento corta a face. Isto porque a aproximação de uma derivada por uma secante é exata no ponto central do segmento, para polinômios de grau menor ou igual a 2. Desta maneira, é mais adequado selecionar o ponto médio do segmento \mathbf{AB} como o ponto alvo da interpolação, Eq. (5-2), ao invés da face. A Equação (5-2) pode então ser reescrita como:

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_{\text{interp}} = \mathbf{AB} \cdot \frac{(\nabla\phi)_A + (\nabla\phi)_B}{2}, \quad (5-16)$$

enquanto o erro do gradiente assume a forma simplificada,

$$\epsilon_{\nabla} \triangleq \frac{\mathbf{AB}}{|\mathbf{AB}|^2} \left\{ (\phi_A - \phi_B) - \mathbf{AB} \cdot \left[\frac{(\nabla\phi)_A + (\nabla\phi)_B}{2} \right] \right\}. \quad (5-17)$$

Essa pequena modificação torna o esquema válido mesmo para malhas irregulares, uma vez que fornece uma força nula para variáveis transportadas obedecendo a uma lei polinomial de grau menor ou igual a dois, independente de a face ser equidistante ou não dos dois centróides vizinhos.

Outra observação interessante a ser explorada é a de que, para os modos de maior frequência espacial possível (ou menores modos suportados pela malha), o valor do gradiente na face calculado de acordo com a Eq. (5-3) não pertence ao intervalo delimitado pelos gradientes avaliados nos centróides vizinhos nos pontos A e B . Isso não ocorre para nenhum outro modo, nem mesmo para o segundo menor modo suportado pela malha, como mostrado na Fig. 5.3.

Baseado nesta constatação, a ação da força artificial adicionada pode ser restringida apenas ao “modo de corte” (menor modo suportado pela

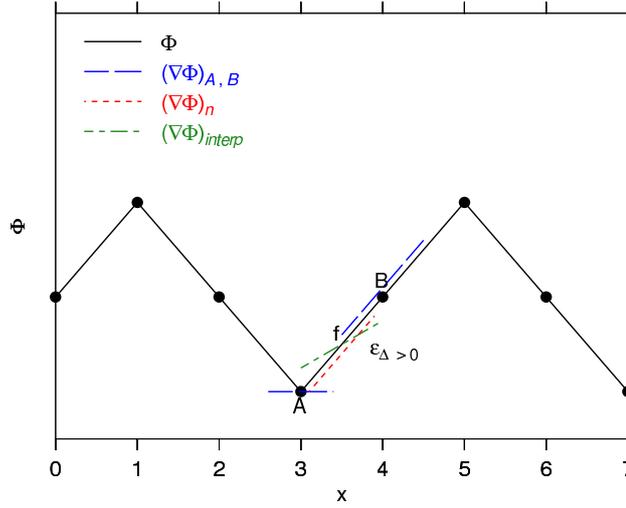


Figura 5.3: Segundo modo mais rápido suportado pela malha e seus gradientes

malha), bastando para isso fazer $\epsilon_{\nabla} = 0$ sempre que $\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_{\mathbf{n}}$ pertencer ao intervalo definido pelos limites $\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_A$ e $\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_B$.

De uma forma mais geral, pode-se definir uma variável ξ , associada a cada segmento de reta \mathbf{AB} unindo dois centróides vizinhos, A e B , que se comporta como uma chave, de maneira a retornar valor unitário para argumento maior ou igual a zero, e valor nulo caso contrário, de acordo com a seguinte equação:

$$\xi_{AB} = \max \left\{ \text{senal} \left[\left(\frac{|g|}{|h|} - \beta_f \right), 0 \right] \right\}, \quad (5-18)$$

onde β_f é uma tolerância arbitrável, e as funções g e h são dadas por

$$g = \phi_A - \phi_B - \frac{1}{2} \mathbf{AB} \cdot [(\nabla\phi)_A + (\nabla\phi)_B], \quad (5-19a)$$

$$h = \mathbf{AB} \cdot [(\nabla\phi)_A - (\nabla\phi)_B], \quad (5-19b)$$

Note-se que g é também uma medida de desvio do gradiente em relação à média dos gradientes vizinhos, guardando a seguinte relação com o erro do gradiente ϵ_{∇}

$$\epsilon_{\nabla} = \frac{\mathbf{AB}}{|\mathbf{AB}|^2} g, \quad (5-20)$$

trazendo consigo a informação do quanto de energia está contida apenas no menor modo, e não nos modos mais suaves.

A variável h , por outro lado, pode ser entendida como uma medida de variação do gradiente de um centróide a outro, podendo ser interpretada como uma indicação da amplitude das estruturas resolvidas, representáveis pela malha.

A razão $|g|/|h|$ na Eq. (5-18), portanto, quantifica, a grosso modo, quão grande é a energia contida nos menores modos, em relação à energia das estruturas resolvidas, formadas por modos mais suaves. Assim, o ajuste do parâmetro β_f permite escolher o limite tolerável da razão de “energias” entre modos indesejáveis e desejáveis, a partir do qual o termo de forçamento começa a agir.

Tal procedimento se mostra bastante adequado em simulações turbulentas, onde a variável transportada é a velocidade, cujo espectro obedece, para escoamentos isotrópicos e homogêneos a altos números de Re , à lei de $-5/3$ de Kolmogorov. Conforme comentado anteriormente, numa releitura do modelo dinâmico (Germano, 1999), Germano identificou que o mesmo funciona como um mecanismo de controle retro-alimentado, no qual se tenta manter constante a razão entre a energia sub-malha e a energia contida no segundo nível de filtragem. De certa forma, a proposta da Eq. (5-18) segue a mesma linha, embora, rigorosamente falando, h não possa ser considerada uma medida de energia. Não obstante, na ausência de grandes estruturas formadas por modos suaves, o valor de h se anula, ao passo que a presença de estruturas vorticiais implica em segundas derivadas não nulas e, conseqüentemente, $h \neq 0$. O valor de g , no entanto, é proporcional à amplitude das estruturas indesejáveis, formadas pelos modos de maior freqüência espacial admitida pela malha, e pode ser considerado, num certo sentido, uma medida da raiz quadrada da energia de tais modos, conforme já mencionado anteriormente.

Alguns casos particulares exemplificam a ação do limitador ξ . Para $\beta_f = 0$, por exemplo, a força artificial está sempre ativa, já que ξ é sempre unitário. Para $\beta_f = 1,2$ a força só entrará em ação quando g for, pelo menos, 20% maior que h , e voltará a ser inativa assim que cair abaixo desse valor. Neste caso, note que o modo apresentado na Fig. 5.3 não sofre nenhuma atenuação pela força \mathbf{f} , o que significa que o único modo atenuado é o “modo de corte”, constituído por oscilações suportadas pela malha, porém não suportadas pelo esquema numérico de diferenças centradas (ou equivalente).

Para variáveis transportadas vetoriais, tais como \mathbf{u} nas equações de Navier-Stokes, os limitadores devem agir sobre cada componente do vetor individualmente. As Eqs. (5-18) e (5-19) são reescritas então como:

$$\xi_{ABi} = \max \left\{ \text{signal} \left[\left(\frac{|g_i|}{|h_i|} - \beta_f \right), 0 \right] \right\}, \quad (5-21)$$

onde o subscrito i aqui denota o i -ésimo componente dos respectivos vetores $(\xi, \mathbf{g}$ e $\mathbf{h})$, e as funções \mathbf{g} e \mathbf{h} são dadas por

$$\mathbf{g} = \mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B - \frac{1}{2} \mathbf{AB} \cdot [(\nabla \mathbf{u})_A + (\nabla \mathbf{u})_B], \quad (5-22a)$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{AB} \cdot [(\nabla \mathbf{u})_A - (\nabla \mathbf{u})_B], \quad (5-22b)$$

Conforme já mencionado, com um termo de forçamento tal qual o descrito pela Eq. (5-7), o tempo necessário para que um “modo de corte” seja completamente atenuado é aproximadamente o mesmo tempo que uma partícula do fluido leva para percorrer um volume de controle, o que corresponde a um número adimensional de Courant unitário. Foi verificado em simulações apresentadas nos capítulos seguintes de validação, Cap. 6, e de resultados, Cap. 7, que esta não é uma condição necessária para robustez numérica e, na prática, pode-se relaxar a força com uma constante multiplicativa α_f ,

$$\mathbf{f} = \alpha_f \mathbf{u} \cdot (\epsilon_{\nabla})_c, \quad (5-23)$$

a qual determina quantas células (ou volumes de controle) o fluido precisa se deslocar, antes que o “modo de corte” seja suficientemente atenuado. Assim, com $\alpha_f = 0,25$, o deslocamento do fluido deve ser quatro vezes maior do que com $\alpha_f = 1$, ou seja, a distância necessária para a atenuação é de aproximadamente quatro células ao invés de apenas uma célula.